



TITLE:

ベクトルの近似直交化を用いた高階線型常微分方程式の整数型解法 (次世代計算科学の基盤技術とその展開)

AUTHOR(S):

坂口, 文則; 林, 正人

CITATION:

坂口, 文則 ...[et al]. ベクトルの近似直交化を用いた高階線型常微分方程式の整数型解法 (次世代計算科学の基盤技術とその展開). 数理解析研究所講究録 2013, 1848: 132-146

ISSUE DATE:

2013-08

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/195082>

RIGHT:

ベクトルの近似直交化を用いた高階線型常微分方程式の整数型解法

坂口文則

福井大学 工学研究科

Fuminori Sakaguchi

Graduate School of Engineering,
University of Fukui

林正人

名古屋大学 多元数理科学研究科;
シンガポール国立大学 量子技術センター

Masahito Hayashi

Graduate School of Mathematics,
Nagoya University;
Centre for Quantum Technologies,
National University of Singapore

1 はじめに

近年筆者らは、多項式または有理関数の係数関数 $p_m(x)$ ($m = 0, 1, \dots, M$) をもつ微分作用素 $P(x, \frac{d}{dx}) = \sum_{m=0}^M p_m(x) (\frac{d}{dx})^m$ よって記述される常微分方程式 (ODE) $P(x, \frac{d}{dx})f = 0$ の、関数 Hilbert 空間 \mathcal{H} に属する M 階連続微分可能な解を求める汎用的な整数型高確度解法を提案した [1] [2] [3]。

この解法は、微分作用素 $P(x, \frac{d}{dx})$ の、ある種の条件を満たす滑らかな基底関数系のペアによる一種のバンド対角行列表現に基づくものであるが、横長行列の厳密カーネルと整数ベクトルの近似直交化とに基づくその手法は、通常の Petrov-Galerkin 法とは大きく異なっており、また、大きな次元の行列の (例えば逆行列や固有値といった) 計算を一切必要とせず、整数の再帰的四則演算のみで ODE を解くことができる。このため、展開係数に丸め誤差が出ない。また、初期条件を与えることなく \mathcal{H} に属する解のみを自動的に抽出することができ、しかも、 \mathcal{H} に属する解の空間の直交系に近い基底を得ること、つまり、 \mathcal{H} に属する直交系に近い ODE の基本解の組を、 \mathcal{H} に属する解の空間の次元数だけ求めることができる。これは、 \mathcal{H} に属する ODE の「一般解」が数値的に求まることを意味する。

本発表では、この整数型解法の原理について説明する。まず、解法の基本的な構造と、必要な諸条件

について説明する。また、それらの条件を満たす関数空間と基底関数の実例を紹介する。さらに、解法で重要な役割を果たす複素整数ベクトルの近似直交化の、比較的少ない計算量で可能な具体的実現方法の 1 つを紹介する。

さらに、実際のいくつかの数値例において、この解法の数値結果がどれほど高い確度 (accuracy) で得られているかを紹介する。(ここでは、working precision と区別するために、敢えて「精度」ではなく「確度」の語を用いる。) また、所要の確度を得るために必要な計算量についても実測により分析し、またそのオーダーを調べる。

最後に、今後の展望として、この解法の偏微分方程式や非線型方程式への応用の可能性や、固有値問題への応用の可能性についても触れる。

2 解法の構造の概要

本節では、本解法の構造を概説する。なお、詳しい解説や証明は、[1] [2] [3] を参照されたい。

本解法は微分作用素 $P(x, \frac{d}{dx})$ のある種の行列表現に基礎を置いているが、上記の Hilbert 空間 \mathcal{H} における $P(x, \frac{d}{dx})$ の作用は一般に非有界作用素となるため、この行列表現の正当性のためには、 $P(x, \frac{d}{dx})$ の作用として定義される \mathcal{H} 上の作用素を考える際に、その定義域や閉包 (closed extension) のとり方には注意が必要となる。

まず、定義域

$$D(\tilde{A}_P) := \{f \in C^M(\mathbb{R}) \cap \mathcal{H} | P(x, \frac{d}{dx})f \in \mathcal{H}\}.$$

をもち、微分作用素 $P(x, \frac{d}{dx})$ の作用によって定義される作用素 \tilde{A}_P を定義する。(適当な \mathcal{H} の選択のもと \tilde{A}_P が可閉であるとする。) \tilde{A}_P の、グラフノルム $\|\cdot\|_{\mathcal{H}} + \|\tilde{A}_P \cdot\|_{\mathcal{H}}$ による閉包として、 \mathcal{H} 上の非有界作用素 A_P を定義する。

一方、上記の \mathcal{H} の他に、集合の意味で \mathcal{H} を含み、かつ \mathcal{H} より弱い異なる内積をもつ (つまり $\mathcal{H}^\diamond \supset \mathcal{H}$ かつ $\forall f \in \mathcal{H}, \langle f, f \rangle_{\mathcal{H}^\diamond} \leq \langle f, f \rangle_{\mathcal{H}}$) Hilbert 空間 \mathcal{H}^\diamond を用意し、これから定義する線型作用素 \tilde{B}_P や B_P の入力側の空間として \mathcal{H} を、出力側の空間として \mathcal{H}^\diamond を用いる。まず、定義域

$$D(\tilde{B}_P) := \{f \in C^M(\mathbb{R}) \cap \mathcal{H} | P(x, \frac{d}{dx})f \in \mathcal{H}^\diamond\}.$$

をもち、微分作用素 $P(x, \frac{d}{dx})$ の作用によって定義される作用素 \tilde{B}_P を定義する。 \tilde{B}_P の、グラフノルム (出力側の空間が \mathcal{H}^\diamond なので、 $\|\cdot\|_{\mathcal{H}} + \|\tilde{B}_P \cdot\|_{\mathcal{H}^\diamond}$) による閉包 (\tilde{B}_P の可閉性については後述) として、 \mathcal{H} から \mathcal{H}^\diamond への非有界作用素 B_P を定義する。

定義より明らかに $A_P \subset B_P$ であるが、このような A_P から B_P への定義域の拡張を行っても、以下に詳述する条件の下に、方程式 $B_P f = 0$ の解空間と方程式 $A_P f = 0$ の解空間の同一性が保証される (つまり、この拡張によって余剰な解を拾うことはない) ことが、[1] で証明されている。本解法は A_P ではなく B_P のある種の行列表示に基づいているが、その正当性が保証されるのは、この性質による。

\mathcal{H} と \mathcal{H}^\diamond の、以下の条件 **C1-3** を満たすそれぞれの正規直交基底 $\{e_n\}_{n=0}^\infty$ と $\{e_n^\diamond\}_{n=0}^\infty$ をとる。

C1 $\forall n \in \mathbb{Z}^+, e_n \in D(\tilde{B}_P)$.

C2 整数 ℓ_0 が存在して、 $|m-n| > \ell_0$ ならば $b_m^n := \langle B_P e_n, e_m^\diamond \rangle_{\mathcal{H}^\diamond} = 0$. (B_P の行列表現がバンド対角)

C3 $e_m^\diamond \in D(C_P)$ かつ $D(\tilde{B}_P)$ の元 f について $\langle B_P f, e_m^\diamond \rangle_{\mathcal{H}^\diamond} = \langle f, C_P e_m^\diamond \rangle_{\mathcal{H}}$ を満たすような、 \mathcal{H}^\diamond の稠密な部分空間から \mathcal{H} への、定義域 $D(C_P)$ をもつ線型作用素 C_P が存在する。

(なお、上記 **C2** は、原理的には「任意の非負整数 m について非負整数 n_m が存在して、 $n > n_m$ ならば $b_m^n = 0$ 」まで緩めることが可能であり、これを

用いると、将来的には本手法を偏微分方程式に拡張することが可能になる。) なお、上記 **C3** の B_P の代わりに \tilde{B}_P を代入した条件 (実際には **C3** と等価) が成立すれば、 \tilde{B}_P の可閉性は自動的に言える [1]。

これらの条件を満たす関数空間と基底について、次の定理が成り立つ。以下では便宜上、5つ組表記 $(P(x, \frac{d}{dx}), \mathcal{H}, \{e_n\}_{n=0}^\infty, \mathcal{H}^\diamond, \{e_n^\diamond\}_{n=0}^\infty)$ を用いる。

定理 2.1 5つ組 $(P(x, \frac{d}{dx}), \mathcal{H}, \{e_n\}_{n=0}^\infty, \mathcal{H}^\diamond, \{e_n^\diamond\}_{n=0}^\infty)$ が条件 **C1-3** を満たすとする。 B_P のカーネルに属する任意の関数 f と任意の非負整数 m について、 ℓ^2 -数列 $\{f_n := \langle f, e_n \rangle_{\mathcal{H}}\}_{n=0}^\infty$ は

$$\sum_{n=\max(0, m-\ell_0)}^{m+\ell_0} b_m^n f_n = 0 \quad (1)$$

を満たす。

つまり定理の条件のもと、 $\{f_n := \langle f, e_n \rangle_{\mathcal{H}}\}_{n=0}^\infty$ が

$$V := \{\vec{f} := \{f_n\}_{n=0}^\infty \mid \sum_{n=0}^\infty b_m^n f_n = 0 \ (m \in \mathbb{Z}^+)\}$$

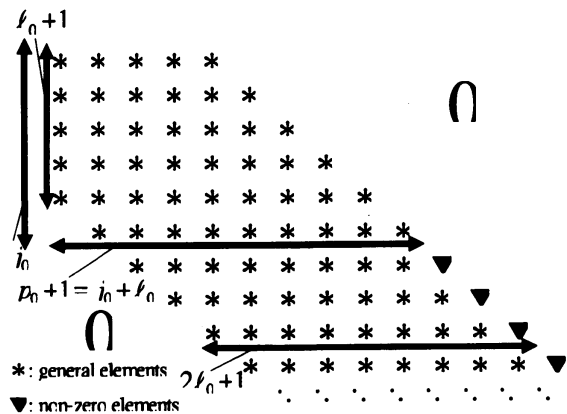
に属することを意味する。しかしながら、(1) を満たす任意の ℓ^2 -数列が、 B_P のカーネルに属するとは限らない (なぜなら、 B_P の定義域に属するとは限らないから)。そこで、次の追加条件が必須となる。

C4 $V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ に属する任意の数列 $\{f_n\}_{n=0}^\infty$ について、和 $\sum_{n=0}^N f_n e_n$ は、 \mathcal{H} のノルムに関して $N \rightarrow \infty$ で $P(x, \frac{d}{dx})f = 0$ のいずれかの解 $f \in C^M(\mathbb{R} \setminus S) \cap \mathcal{H}$ に収束する。但し、 S は特異点の集合とする。

この **C4** を満たすためのもっと実用的で汎用性の高い十分条件の組があり、[1] と [3] で詳述されているが、ここでは省略する。

ODE が特異点をもたないときは、次が成立する。

定理 2.2 ODE $P(x, \frac{d}{dx})f = 0$ が特異点をもたず、かつ5つ組 $(P(x, \frac{d}{dx}), \mathcal{H}, \{e_n\}_{n=0}^\infty, \mathcal{H}^\diamond, \{e_n^\diamond\}_{n=0}^\infty)$ が **C1-C4** を満たすならば、写像 $f \mapsto \{\langle f, e_n \rangle_{\mathcal{H}}\}_{n=0}^\infty$ は、(1) の ℓ^2 -数列解と $C^M(\mathbb{R}) \cap \mathcal{H}$ に属する ODE の解との間に、1対1対応を作る。

図 1: バンド対角行列 b_m^n の図

ODE が特異点をもつても Fuchs 型 (すべての特異点が確定特異点) の場合は、少しの変形で同様の定理 ([1] の Theorem 2.3) が成立する。したがって、これらの場合には、連立 1 次方程式 (1) の ℓ^2 -数列解と $C^M(\mathbb{R} \setminus S) \cap \mathcal{H}$ に属する ODE の真解との間の 1 対 1 対応が成立する。

ODE が特異点をもつ Fuchs 型でない場合、上記 C3 が成立するとは限らないため 1 対 1 対応は一般には保証されないが、少なくとも、連立方程式の全ての ℓ^2 -数列解が ODE の $C^M(\mathbb{R} \setminus S) \cap \mathcal{H}$ に属するいずれかの真解に対応していることは保証される [1]。つまり、Fuchs 型でない場合には、すべての解が数値的に求まるとは限らないが、少なくとも、求まった数値解が幽霊解でないことは保証される。

したがって、これらのいずれの場合にも、ODE を解くことは、連立 1 次方程式 (1) の ℓ^2 -数列解を求める問題に還元される。それを再帰的解法で計算できるように次の条件をおく。

C5 非負整数 j_0 が存在して、 j_0 以上の任意の整数 m について $b_m^{m+\ell_0} \neq 0$ 。

(この条件は、次節で紹介する基底関数を用いた場合、後述のように、非常に特殊な場合を除いて必ず満たされ、しかも j_0 は小さい。)

この条件のもとに、 B_P の行列表現は図 1 のようになり、連立 1 次方程式 (1) を解く問題は、小さな

次元の連立方程式 ($j_0 + \ell_0$ 元 $j_0 + 1$ 連立 1 次方程式) を解く問題と、 $n \geq j_0 + \ell_0 + 1$ について四則演算のみでできる再帰計算

$$f_n = -\frac{1}{b_{n-\ell_0}^n} \sum_{m=n-2\ell_0}^{n-1} b_{n-\ell_0}^m f_m \quad (2)$$

のみに還元可能である。特に、行列要素 b_m^n がすべて有理複素数の場合は、すべて整数の四則演算のみに還元される。後述のように、次節で紹介する基底関数を用いた場合、ODE の係数関数がある有理複素係数多項式で書ける場合には、必ずそのようになることが示せ、すべて整数の四則演算に還元できる。(その具体的な手順については、以下の議論と合わせて後ほど表 1 に纏める。)

しかしながら、このようにして求められた数列解は一般に $\ell^2(\mathbb{Z}^+)$ に属するとは限らない。このことは、空間 V の次元は少なくとも行列のバンド幅以上あるのに対し、 $C^M(\mathbb{R}) \cap \mathcal{H}$ に属する ODE の解の空間の次元 (すなわち $V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ の次元) は M 以下であり、前者のほうがはるかに大きいことから容易に示せる。そこで、この再帰計算によって得られた V の基底の 1 次結合を取り直すことにより、 $V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ に属する成分のみを抽出する必要がある。

この抽出を近似的に行うために、以下の方法を提案する。以下では、 Π_n を $\langle e_0, e_1, \dots, e_n \rangle$ への射影子 (つまり、 $n+1$ 次元までの打ち切り作用素) とする。 $j_0 + \ell_0 - 1 \leq K \leq N$ を満たすような整数 K と N をとり、また、 $\forall \vec{f} \in \ell^2(\mathbb{Z}^+)$, $\Omega(\vec{f}) \geq \|\vec{f}\|_{\ell^2}^2 := \sum_{n=0}^{\infty} |f_n|^2$ を満たすような $\ell^2(\mathbb{Z}) \times \ell^2(\mathbb{Z})$ 上の双 1 次形式 $\Omega(\vec{f}, \vec{g})$ とそれに対応する $\ell^2(\mathbb{Z})$ 上の 2 次形式 $\Omega(\vec{f})$ をとる。そして、それらの比とその最小

$$\sigma_{K,N}^{(\Omega)}(\vec{f}) := \frac{\Omega(\Pi_N \vec{f})}{\|\vec{f}\|_{\ell^2,K}^2} \quad \text{for } \vec{f} \in V \setminus \{0\} \quad (3)$$

$$\sigma_{K,N}^{(\Omega)} := \min_{\vec{f} \in V \setminus \{0\}} \sigma_{K,N}^{(\Omega)}(\vec{f}).$$

を定義する。これらは、条件 C2, C5 と不等式 $K \geq j_0 + \ell_0 - 1$ より $\vec{f} \in V \setminus \{0\}$ について常に $\|\vec{f}\|_{\ell^2,K} :=$

$\|\Pi_K \vec{f}\|_{\ell^2} > 0$ が示せることより、定義可能である。このとき、内積 $\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle_{\ell^2, K} := \langle \Pi_K \vec{x}, \Pi_K \vec{y} \rangle_{\ell^2}$ に関する W への射影子を $P_{W, K}$ で表すと、以下の定理が成り立つ。

定理 2.3 固定した $K (\geq j_0 + \ell_0 - 1)$ のもと、 $N \rightarrow \infty$ で以下が成立する。

$$\sup_{\vec{x} \in (\sigma_{K, N}^{(\Omega)})^{-1} [\sigma_{K, N}^{(\Omega)}, c\sigma_{K, N}^{(\Omega)}]} \frac{\|P_{V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+), K} \vec{x} - \vec{x}\|_{\ell^2, K}}{\|\vec{x}\|_{\ell^2, K}} \rightarrow 0.$$

(なお、これに対応する箇所、[1] の (18)(19) 式には、 $P_{V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+), K}$ とあるべきところが誤って $P_{V, K}$ となっているという不注意ミスがあり、訂正したい。) また逆に、 $N \rightarrow \infty$ で $\Pi_K(V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+))$ の任意の元に一致する $\Pi_K(\sigma_{K, N}^{(\Omega)})^{-1} [\sigma_{K, N}^{(\Omega)}, c\sigma_{K, N}^{(\Omega)}]$ の元が存在することも示せる [1]。したがって、ODE を近似的に解く問題は、 $(\sigma_{K, N}^{(\Omega)})^{-1} [\sigma_{K, N}^{(\Omega)}, c\sigma_{K, N}^{(\Omega)}]$ に属するベクトルを見つける問題に帰着できる。

なお、再帰的計算 (2) においては、どのような初期ベクトルから出発しても、 n が大きくなるにつれ発散の強い成分が支配的となり、1 次独立な初期ベクトルの組から出発しても、数値的には殆んど平行なベクトルの組しか得られない。このため、2 つの 2 次形式の比を最小化する問題でよく用いられる、対応する 2 つの双 1 次形式の内積行列 A, B によって定義される行列 $A^{-1/2} B A^{-1/2}$ の最小固有空間を求める方法では、 A や B がランク 1 の特異行列に数値的に非常に近くなり、激しい桁落ちが起こるため、計算することは困難である。

そこで、 $(\sigma_{K, N}^{(\Omega)})^{-1} [\sigma_{K, N}^{(\Omega)}, c\sigma_{K, N}^{(\Omega)}]$ に属するベクトルを比較的少ない計算量で見つける一方法として、4 節で紹介する整数ベクトルの近似直交化法を提案した。これは、上記の双 1 次形式 Ω を用いて定義される発散に敏感な内積 $\|\vec{f}, \vec{g}\|_{\Omega, N} := \Omega(\Pi_N \vec{f}, \Pi_N \vec{g})$ に関して基底ベクトルの組を近似直交化することによって $V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ の元を非常によく近似するベクトルを得る方法である。この方法の原理とその証明については [2] に詳しい解説があるので、そちらを参照されたい。

なお、この方法においては、殆んど平行に近いベ

表 1: 解法の手順 ($V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ が 1 次元の場合)

Step 1 $\Pi_{p_0} V$ ($p_0 := j_0 + \ell_0 - 1$) の基底の計算: $\Pi_{p_0} V$ の基底の 1 つ $\{F_n^{(1)}\}_{n=0}^{p_0}, \dots, \{F_n^{(d)}\}_{n=0}^{p_0}$ を、ガウスの消去法で求める (p_0 は小さいので、この厳密計算は少ない計算量の整数演算で容易)。 V の次元 d は、この結果により自動的に求まる。
Step 2 $\Pi_n V$ ($p_0 + 1 \leq n \leq N$) の基底ベクトルの再帰的計算: $n = p_0 + 1, p_0 + 2, \dots, N$ について、(2) と同様の再帰的計算を反復し、 $\Pi_N V$ の基底 $\{F_n^{(1)}\}_{n=0}^N, \dots, \{F_n^{(d)}\}_{n=0}^N$ を求める。
Step 3 $\Pi_K V$ から $V \setminus (V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+))$ に対応する成分を除去: $\{F_n^{(1)}\}_{n=0}^N, \dots, \{F_n^{(d)}\}_{n=0}^N$ の 1 次結合を、後述の整数型近似直交化によって取り直すことにより、 $\Pi_N \left((\sigma_{K, N}^{(\Omega)})^{-1} [\sigma_{K, N}^{(\Omega)}, c\sigma_{K, N}^{(\Omega)}] \right)$ に属するベクトルの 1 つ $\vec{G}^{(1)}$ を見つける。さらにそれを Π_K で射影する。

クトルの組を何度も近似直交化するが、本解法で整数型で展開係数に丸め誤差が全くないので、桁落ちの問題は一切起こらず、それらのベクトルの組によって張られるベクトル空間は、近似直交化を何度行っても、完全に厳密なまま不変に保たれる。

また、 $\ell^2(\mathbb{Z}^+)$ に属さない成分が残留しやすい、 n が大きい部分は用いないほうが良いため、 $N+1$ 次元ベクトルで近似直交化を行うが、最終結果は $K+1$ ($K < N$) 次元の近似部分空間に射影する [1] [2]。

$V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ が 1 次元の場合について、以上で概説した解法の具体的手順を、表 1 に纏める。

$V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ が多次元の場合は、この方法ですでに求められた $V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ の近似基底ベクトルと普通の $\ell^2(\mathbb{Z}^+)$ -内積に関して直交に近い方向に次の近似基底ベクトルを探すことが、やはり同じ整数ベクトルの近似直交化法を、先ほどとは別な内積 ($\Pi_K \vec{f}, \Pi_K \vec{g}$) に関して適用することにより可能であり、この 2 種類の近似直交化を交互に組み合わせることにより、 $\ell^2(\mathbb{Z}^+)$ -内積に関して直交系に近い $V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ の基底のよい近似を得ることができる [2]。

それらが直交系に近いことで、これらの近似基底

の任意の1次結合が $V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ のいずれかの元のよい近似になっていることが不等式で示せ、一般解の誤差が最悪の場合でも抑えられる [2]。(これに反し、近似基底が直交系から外れると、一般にはこれは保証されないため、これを抑えておくことは重要である。特に、ベクトル空間の次元が大きいときには、直交系から僅かにずれただけで数値的に1次従属に非常に近い状況なることがあり得るので、注意を要する。)

$V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ が多次元の場合の解法の具体的手順については、多少のページ数を要し、また、[1] [2] に詳しい解説があるので、ここでは表略する。

3 関数空間と基底

ODE の係数関数 $p_m(x)$ が多項式か有理関数の場合、条件 C1-4 を満たすような関数空間のと基底関数の例の中で、整数型解法に適した例を示す。 k を整数パラメータとして、内積

$$(f, g)_{(k)} := \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \overline{g(x)} (x^2 + 1)^k dx \quad (4)$$

とそれに対応するノルム $\|\cdot\|_{(k)}$ ($\|f\|_{(k)}^2 = (f, f)_{(k)}$) を導入し、関数空間

$$L_{(k)}^2(\mathbb{R}) := \{f : \text{可測} \mid \|f\|_{(k)} < \infty\}$$

を定義する。定義より、 $k_1 \geq k_2$ のとき $L_{(k_1)}^2(\mathbb{R}) \subset L_{(k_2)}^2(\mathbb{R})$ であり、また、 $L_{(0)}^2(\mathbb{R}) = L^2(\mathbb{R})$ である。

次に、関数 $\psi_{k, \tilde{n}}(x) := \frac{1}{(x+i)^{k+1}} \left(\frac{x-i}{x+i}\right)^{\tilde{n}}$ を定義する。(この関数は、代数 $\mathfrak{su}(1, 1)$ のある種の表現に関連した個数状態 [4] と深い関係がある。本解法の発案は、ここに端を発する。) この関数のグラフの例を、図2に示す。このように、紡錘形の包絡をもつ三角関数様の波束であり、特に $k \rightarrow \infty$ で、ガボール関数(ガウス関数と三角関数の積)に収束するという性質がある [2]。また、この関数は、 $\{\frac{1}{\sqrt{\pi}} \psi_{k, \tilde{n}}(x) \mid \tilde{n} \in \mathbb{Z}\}$ が $L_{(k)}^2(\mathbb{R})$ の正規直交基底をなすという、重要な性質をもつ ([1] の Lemma 3.1)。

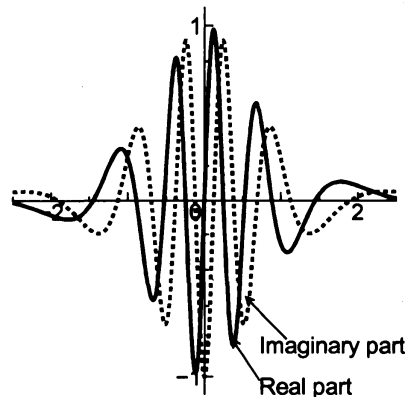


図 2: 関数 $\psi_{k, \tilde{n}}(x)$ のグラフの例 ($k=2, \tilde{n}=5$)

また、この関数は、次の3つの漸化式を満たす。

$$\begin{aligned} \psi_{k, \tilde{n}}(x) &= -\frac{i}{2} (\psi_{k-1, \tilde{n}}(x) - \psi_{k-1, \tilde{n}+1}(x)) \\ x \psi_{k, \tilde{n}}(x) &= \frac{1}{2} (\psi_{k-1, \tilde{n}}(x) + \psi_{k-1, \tilde{n}+1}(x)) \\ \frac{d}{dx} \psi_{k, \tilde{n}}(x) &= \tilde{n} \psi_{k+1, \tilde{n}-1}(x) - (\tilde{n} + k + 1) \psi_{k+1, \tilde{n}}(x) \end{aligned} \quad (5)$$

以上のことより、次のような選択が可能である。(以下では、ODE の $P(x, \frac{d}{dx})$ の係数関数 $p_m(x)$ ($m=0, 1, \dots, M$) の分母の最小公倍数を全体にかけてすべての分母を払うことで、 $p_m(x)$ ($m=0, 1, \dots, M$) がすべて x の多項式である場合を考える。) $k_0^\diamond \leq k_0 - \max_m (\deg p_m - m)$, $k_0 \geq 0$ を満たす整数の組 k_0, k_0^\diamond を用いて

$$\mathcal{H} = L_{(k_0)}^2(\mathbb{R}), \quad \mathcal{H}^\diamond = L_{(k_0^\diamond)}^2(\mathbb{R})$$

$$e_n = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \psi_{k_0, \tilde{n}_{k_0, n}}, \quad e_n^\diamond = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \psi_{k_0^\diamond, \tilde{n}_{k_0^\diamond, n}}$$

$$\text{但し } \tilde{n}_{k, n} := \left\lfloor -\frac{k+1}{2} \right\rfloor + (-1)^{n+k+1} \left\lfloor \frac{n+1}{2} \right\rfloor$$

をとる。すると、これらは C1-4 を満たす [1]。

また、これらの選択のもと、係数関数の分母や最高階係数の分子が $x = \pm i$ を根にもたなければ、前節で説明した条件 C5 は、必ず満たされ、しかも、 $\ell_0 = 2M + k_0 - k_0^\diamond$ である [1]。また、 $x = \pm i$ を根にもつ特別な場合には、座標 x のシフトやスケール変換によって根をずらすことにより、一般に C5 が満たされようにすることができる。

係数関数多項式 p_m の係数が全て (複素) 有理数の場合には、これらの関数空間や基底関数の選択のもとでは、 B_P の行列表示の行列要素 $(B_P e_n, e_m^\diamond)_{\mathcal{H}^\diamond}$ は、関数の内積を計算することなく、上記の漸化式の利用により、係数関数多項式 p_m の係数のみから整数の四則演算のみで高速計算可能である。その詳細については、[2] の 4 節を参照されたい。

4 整数型近似直交化と計算量節約

2 節の後半で説明したように、本解法は、複素整数ベクトルの、発散に敏感な内積 $\|\vec{f}, \vec{g}\|_{\Omega, N} = \Omega(\Pi_N \vec{f}, \Pi_N \vec{g})$ に関する近似直交化に基づいている。本節では、これについて概説する。

まず、表 1 の **Step 2** で得られたベクトルの組 $\{F_n^{(1)}\}_{n=0}^N, \dots, \{F_n^{(d)}\}_{n=0}^N$ (これらは、数学的には 1 次独立であるが、前述の理由により、数値的には、ほとんどみな平行に近い) を近似直交化する。

Gram-Schmidt 法による厳密な直交化では、ベクトル更新を 1 回行うごとに分母分子の整数の桁数が約 3 倍になり、計算量がベクトル更新回数の指数のオーダーで爆発する。それを防ぐために、整数の桁数をできるだけ増やさずに、なるべく直交系に近いベクトルの組を取り直す方法の 1 つとして、Gram-Schmidt 法と Euclid の互除法の中間的なアイデアから生まれた、整数格子を用いた複素整数ベクトルの近似直交化法を提案した [2]。簡単のため、ここでは $V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ が 1 次元の場合について説明する。

この手法の基本的なアイデアは、表 2 のようになる。これを簡単に説明すると、以下ようになる。まず、次のプロセス **Q1** を反復する。まず、ベクトルの組を、ノルムの小さい順に並べ替える。そして、Gram-Schmidt 法のようなベクトル更新を行うが、厳密な垂線の足の代わりに、更新が済んだベクトルの整数係数の 1 次結合で作られる格子の最も近い格子点を採用する (つまり内積の比の複素四捨五入 $[\cdot]_C$ を用いる)。また、規格化を行わない。これを、ベクトルの組が変わらなくなるまで繰り返す。この各プロセスでは、ベクトル更新により整数の絶対値が増

表 2: 整数型近似直交化の基本的な考え方

In the following, $[z]_C := -\text{sgn}(\text{Re } z) \lfloor \frac{1}{2} - \text{Re } z \rfloor - i \text{sgn}(\text{Im } z) \lfloor \frac{1}{2} - \text{Im } z \rfloor$	
Iterate Q1 below until nothing is changed.	
Q1	<ul style="list-style-type: none"> • sorting and renumbering of $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_d$ in order that $\ \vec{v}_1\ _{\Omega, N} \leq \ \vec{v}_2\ _{\Omega, N} \leq \dots \leq \ \vec{v}_d\ _{\Omega, N}$ • for $j = 2$ to d <ul style="list-style-type: none"> for $\ell = 1$ to $j - 1$ $\vec{v}_j \leftarrow \vec{v}_j - \left[\frac{\langle \vec{v}_j, \vec{v}_\ell \rangle_{\Omega, N}}{\langle \vec{v}_\ell, \vec{v}_\ell \rangle_{\Omega, N}} \right]_C \vec{v}_\ell$ <p>(This is a preparatory ‘imperfect’ lattice reduction for the iteration of Q2 below.)</p>
Iterate Q2 below until nothing is changed.	
Q2	<ul style="list-style-type: none"> for $j = 2$ to d <ul style="list-style-type: none"> for $\ell = 1$ to $j - 1$ <ul style="list-style-type: none"> if $h^2 \cdot \langle \vec{v}_j, \vec{v}_\ell \rangle_{\Omega, N} ^2 \geq \ \vec{v}_j\ _{\Omega, N}^2 \cdot \ \vec{v}_\ell\ _{\Omega, N}^2$, $\vec{v}_j \leftarrow 2\vec{v}_j$ $\vec{v}_j \leftarrow \vec{v}_j - \left[\frac{\langle \vec{v}_j, \vec{v}_\ell \rangle_{\Omega, N}}{\langle \vec{v}_\ell, \vec{v}_\ell \rangle_{\Omega, N}} \right]_C \vec{v}_\ell$ <p>(This process provides us with the vectors \vec{v}_j ($1 \leq j \leq d$) s.t. $\frac{ \langle \vec{v}_j, \vec{v}_\ell \rangle_{\Omega, N} }{\ \vec{v}_j\ _{\Omega, N} \cdot \ \vec{v}_\ell\ _{\Omega, N}} \leq \frac{1}{h}$ for $1 \leq j < \ell \leq d$.)</p>

加しない (普通は減少する) ので、計算量の爆発が防げる。この反復によって直交性が目標より良くない場合は、直交性の悪いベクトルを 2 倍して再び繰り返せば (**Q2**)、いつかは目標を満たす。

但し、本解法では、内積計算が最も計算量が嵩むので、**Q1** **Q2** の更新において内積計算はいちいち行わず、更新のとき用いる係数を用いて内積も自動更新することにより、計算量を大幅に減らせることができる [2]。その実用的手順を表 3 に示す。

なお、これらの反復が有限回で停止することは、[2] の 9 節で証明済みである。しかしながら、後述のように、経験的には、このプロセスで要する計算量は、他の計算 (特に内積そのものの計算) に比べて小さいので、実用的には殆んど問題はない。

上記の $\{F_n^{(1)}\}_{n=0}^N, \dots, \{F_n^{(d)}\}_{n=0}^N$ に、各数列の全ての有理数の分母の最小公倍数をかけて複素整数ベクトル化したものを $\vec{F}_{\text{int.}}^{(1)}, \dots, \vec{F}_{\text{int.}}^{(d)}$ とし、これを

表 3: 整数型近似直交化の実用的手順

for $j = 1$ to d	
for $m = 1$ to d	
$\begin{cases} c_{jm} \leftarrow \delta_{jm} \\ p_{jm} \leftarrow \langle \vec{v}_j^{(\text{initial})}, \vec{v}_m^{(\text{initial})} \rangle_{\Omega, N} \\ q_{jm} \leftarrow \langle \vec{v}_j^{(\text{initial})}, \vec{v}_m^{(\text{initial})} \rangle_{\ell^2, K} \\ \left(\begin{array}{l} c_{jm} : \text{complex-integer-valued coefficients} \\ \text{for } \vec{v}_j^{(\text{new})} = \sum_{m=1}^d c_{jm}^{(\text{new})} \vec{v}_m^{(\text{initial})} \end{array} \right) \end{cases}$	
Iterate P1 below until nothing is changed.	
P1	<ul style="list-style-type: none"> with the renumbering (permutation of $1, 2, \dots, d$) such that $p_{11} \leq p_{22} \leq \dots \leq p_{dd}$ may hold,
	for $j = 1$ to d
	$\begin{cases} c_{jm} \leftarrow c_{n_j m}, p_{jm} \leftarrow p_{n_j n_m}, q_{jm} \leftarrow p_{n_j n_m} \\ \text{for } j = 2 \text{ to } d \\ \text{for } \ell = 1 \text{ to } j-1 \\ r \leftarrow \left[\frac{p_{j\ell}}{p_{\ell\ell}} \right]_C \\ \text{for } m = 1 \text{ to } d \\ \begin{cases} c_{jm} \leftarrow c_{jm} - r c_{\ell m}, p_{jm} \leftarrow p_{jm} - r p_{\ell m}, \\ q_{jm} \leftarrow q_{jm} - r q_{\ell m} \end{cases} \\ \text{for } m = 1 \text{ to } d \\ p_{mj} \leftarrow p_{mj} - \bar{r} p_{m\ell}, q_{mj} \leftarrow q_{mj} - \bar{r} q_{m\ell} \end{cases}$
	for $j = 2$ to d
	for $\ell = 1$ to $j-1$
	if $h^2 \left[\frac{p_{j\ell}}{N^K} \right]_C \left[\frac{p_{j\ell}}{N^K} \right]_C \geq \left(\left[\frac{p_{j\ell}}{N^K} \right] + 1 \right) \left(\left[\frac{p_{\ell\ell}}{N^K} \right] + 1 \right),$
	for $m = 1$ to d
	$\begin{cases} p_{mj} \leftarrow 2p_{mj}, q_{mj} \leftarrow 2q_{mj} \\ p_{jm} \leftarrow 2p_{jm}, q_{jm} \leftarrow 2q_{jm} \end{cases}$
	$r \leftarrow \left[\frac{p_{j\ell}}{p_{\ell\ell}} \right]_C$
	for $m = 1$ to d
	$\begin{cases} c_{jm} \leftarrow c_{jm} - r c_{\ell m}, p_{jm} \leftarrow p_{jm} - r p_{\ell m}, \\ q_{jm} \leftarrow q_{jm} - r q_{\ell m} \end{cases}$
	for $m = 1$ to d
	$p_{mj} \leftarrow p_{mj} - \bar{r} p_{m\ell}, q_{mj} \leftarrow q_{mj} - \bar{r} q_{m\ell}$
Iterate P2 below until nothing is changed.	
P2	for $j = 2$ to d
	for $\ell = 1$ to $j-1$
	if $h^2 \left[\frac{p_{j\ell}}{N^K} \right]_C \left[\frac{p_{j\ell}}{N^K} \right]_C \geq \left(\left[\frac{p_{j\ell}}{N^K} \right] + 1 \right) \left(\left[\frac{p_{\ell\ell}}{N^K} \right] + 1 \right),$
	for $m = 1$ to d
	$\begin{cases} p_{mj} \leftarrow 2p_{mj}, q_{mj} \leftarrow 2q_{mj} \\ p_{jm} \leftarrow 2p_{jm}, q_{jm} \leftarrow 2q_{jm} \end{cases}$
	$r \leftarrow \left[\frac{p_{j\ell}}{p_{\ell\ell}} \right]_C$
	for $m = 1$ to d
	$\begin{cases} c_{jm} \leftarrow c_{jm} - r c_{\ell m}, p_{jm} \leftarrow p_{jm} - r p_{\ell m}, \\ q_{jm} \leftarrow q_{jm} - r q_{\ell m} \end{cases}$
	for $m = 1$ to d
	$p_{mj} \leftarrow p_{mj} - \bar{r} p_{m\ell}, q_{mj} \leftarrow q_{mj} - \bar{r} q_{m\ell}$
for $j = 1$ to d	
$\vec{v}_j^{(\text{final})} \leftarrow \sum_{m=1}^d c_{jm}^{(\text{final})} \vec{v}_m^{(\text{initial})}$	
for $\ell = 1$ to d	
if $j \geq 1$ or $m \geq 1,$	
$\langle \vec{v}_j^{(\text{final})}, \vec{v}_\ell^{(\text{final})} \rangle_{\Omega, N} \leftarrow \sum_{m=1}^d \sum_{n=1}^d c_{jm}^{(\text{final})} \bar{c}_{\ell n} p_{mn}$	
$\langle \vec{v}_j^{(\text{final})}, \vec{v}_\ell^{(\text{final})} \rangle_{\ell^2, K} \leftarrow \sum_{m=1}^d \sum_{n=1}^d c_{jm}^{(\text{final})} \bar{c}_{\ell n} q_{mn}$	

$\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_d$ に代入して、十分大きな整数 h のもとに表 2 のプロセスを行い、それを終えた後の $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_d$ を $\vec{E}^{(1)}, \dots, \vec{E}^{(d)}$ と定義する。各 $\vec{E}^{(n)}$ について (3) で定義された $\sigma_{K,N}^{(\Omega)}(\vec{E}^{(n)})$ を計算し、その値が最小となる $\vec{E}^{(n)}$ を $\vec{G}^{(1)}$ と定義する。この $\vec{G}^{(1)}$ について、次の定理が成立する。

定理 4.1 $h \geq d$ ならば、ベクトル $\vec{G}^{(1)}$ は $\Pi_N \left((\sigma_{K,N}^{(\Omega)})^{-1} \left[\sigma_{K,N}^{(\Omega)}, \frac{d}{1-\frac{d}{h}} \sigma_{K,N}^{(\Omega)} \right] \right)$ に属する。

この定理と定理 2.3 より、 $\Pi_K \vec{G}^{(1)}$ は ODE の数値解を表すベクトルの候補となる。つまり、 $\sum_{n=0}^K (\vec{G}^{(1)})_n e_n(x)$ を数値解とすればよい。この数値解の誤差上限に関する不等式は、[2] にある。

$V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ が多次元の場合には、手順が煩雑にはなるものの、基本的には 1 次元の場合と同様の方法が可能である。その説明には多くのページ数を要するので、その詳細については、[2] を参照されたい。また、 $V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+)$ の次元数だけ求められた 1 次独立な数値解の任意の 1 次結合について、最悪の場合でも真の解への収束が保証され、その誤差上限に関する不等式も [2] で証明されている。

5 数値例

本解法は本来は解析的に解けない ODE のための数値解法であるが、ここでは計算結果の確度を直接調べるために、敢えて解析的に解ける場合について、本解法による数値解と、厳密解の任意精度計算 (Wolfram Research 社の 'Mathematica' を利用) の結果とを比較し、本解法による数値解が厳密解と何桁目まで一致しているか、その有効数字桁数を実際に数えてみた。

2 節で説明した、発散に敏感な内積として、重み

$$w_n := \begin{cases} 1 & (n \leq K) \\ e^{r(\mu_n - \mu_K)} & (K < n < J) \\ R := e^{r(\mu_J - \mu_K)} & (n \geq N) \end{cases}$$

$$\text{但し } \mu_n := \left| \ddot{n}_{k_0, n} - \frac{k_0 + 1}{2} \right| - \frac{k_0 + 1}{2}$$

つきの

$$\|\vec{f}, \vec{g}\|_{\Omega, N} = \Omega(\Pi_N \vec{f}, \Pi_N \vec{g}) = \sum_{n=0}^{\infty} w_n f_n \bar{g}_n$$

を用いた。重み w_n の定義は一見したところ複雑であるが、これは基底関数に用いた関数の対称性 $\psi_{k_0, \tilde{n}}(x) = \psi_{k_0, -\tilde{n}-k-1}(x)$ を考慮したものである。また、今回は $K = 2\lfloor \frac{3(N-k_0)}{8} \rfloor + k_0$, $J = 2\lfloor \frac{7(N-k_0)}{16} \rfloor + k_0$ あるいは $K = 2\lfloor \frac{7(N-k_0)}{16} \rfloor + k_0$, $J = 2\lfloor \frac{15(N-k_0)}{32} \rfloor + k_0$ を用い、 $r = 10^8$ としたものを使用した。

なお、巨大整数の演算は、オーバーフローを防ぐため、固定長整数の配列を用いて処理している（今回は 10^9 を基とする位取り記数法、すなわち十億進数を用いて配列化した）。より適切な選択肢として、多倍長計算パッケージを用いることも可能である。

最初の例として、2階 ODE

$$(9x^2 - 6x + 5)f'' + (90x - 30)f' + 126f = 0 \quad (6)$$

を挙げる。この ODE の $L^2_{(k_0)}(\mathbb{R})$ に属する厳密解は、 $k_0 \leq 3$ のときは $\left\{ \frac{C(3x-1)}{((3x-1)^2+4)^4} \mid C \in \mathbb{C} \right\}$ である。この ODE について、 $k_0 = 2$, $N+1 = 18, 24$, $K = 2\lfloor \frac{3N}{8} \rfloor + k_0$, $J = 2\lfloor \frac{7N}{16} \rfloor + k_0$ としたときの結果を以下に示す。但し、定数 C は任意であるので、この任意性を除去するため、 $\langle f, \frac{1}{2\pi}(\psi_{k_0,0} + \psi_{k_0,-k_0-1}) \rangle_{\mathcal{H}} = 1$ となるように C をとったときの数値解について調べる。得られた数値解のグラフを描いても、小さな N ですでに厳密解のグラフと殆んど重なってしまうため、その確度をみるために、次のような分析を行った。まず、解を基底で展開 ($f(x) = \sum_n f_n e_n(x)$) したときの展開係数の比 $\frac{f_2}{f_0}$ をみてみたところ、表4のようになった。この ODE の場合、展開係数の比の真値はすべて有理複素数になり、例えば、 $\frac{f_1}{f_0} = 1$, $\frac{f_2}{f_0} = \frac{-42251 + 41166i}{28561}$ である。 $\frac{f_2}{f_0}$ は $N = 48$ ですでに厳密比に到達していることがわかる。また、 $N = 48$ では、他の展開係数の比も同様に厳密比に達していることを確認した。 $N > 48$ でも、厳密比が得られることを確認した。これは、厳密解か

ら近似空間へ下ろした垂線の足が数値的に誤差なしで求まっていることを意味する。しかしながら、有限の K で打ち切っているため、この垂線の長さは不可避な誤差となり、解関数 $f(x)$ の数値解がどこまで正確かは、これだけではわからない。しかしながら、展開係数 f_n の振る舞いを調べると表5のようになり、 n に関して殆んど指数的に 0 に収束していくことがわかる。このため、解関数 $f(x)$ の数値解も非常に高い確度をもつことが期待されるが、実際、2つの座標点の間の解関数の比 $f(2)/f(1)$ が $N+1 = 10000$ で厳密比 $\frac{5}{2} \left(\frac{8}{29}\right)^4 = 1.44779797562779150 \dots \times 10^{-2}$ に 1942 桁目まで一致していることを確認した。また、他の座標点でも同様の確度が得られていることを確認した。

次の例として、Weber の微分方程式（調和振動子の Schrödinger 方程式と等価）

$$f'' - x^2 f + (2\nu + 1)f = 0 \quad (7)$$

を挙げる。よく知られているように、 $\nu \in \mathbb{Z}^+$ の場合、 $C^2(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ に属するこの ODE の解は $\{C(\exp \frac{-x^2}{2}) H_\nu(x) \mid C \in \mathbb{C}\}$ であり、これは、任意の $k_0 \in \mathbb{Z}^+$ について $L^2_{(k_0)}(\mathbb{R})$ に含まれる。 $\nu = 0$, $k_0 = 3$, $K = 2\lfloor \frac{7(N-k_0)}{16} \rfloor + k_0$, $J = 2\lfloor \frac{15(N-k_0)}{32} \rfloor + k_0$ としたときの結果を以下に示す。まず、展開係数の比の数値結果の例を表6に示す。比較的小さな N でも非常に高い確度がえられていることがわかる。さらに、 $N+1 = 7000$ で 340 桁目まで一致していることを確認した。図3に、この展開係数比の一致桁数が N にどう依存するかをプロットした。さらに、数値解の展開係数比（有理数）が、次の意味で厳密比の非常により有理近似になっていることが判明した。

$$\rho := \frac{(\text{比が厳密比と一致した桁数})}{(\text{比の分子の桁数}) + (\text{比の分母の桁数})} \quad (8)$$

をプロットすると、図4のようになり、 N が 100 以上では、これは殆んど 1 に近い値となる。つまりこれは、数値解の比の有理数を表記するために必要な数字の個数とほぼ同じ桁数に対応する確度が得られていることを意味する。

表 4: 展開係数の比 $\frac{f_2}{f_0}$ の数値結果

$N+1$	比 $\frac{f_2}{f_0}$	$\text{Re } \frac{f_2}{f_0}$ の値	$\text{Im } \frac{f_2}{f_0}$ の値	厳密解との一致桁数	
18	$\frac{-59 + 31i}{33}$	-1.78787878...	+0.93939393...	1	0
24	$\frac{-2051 + 1976i}{1381}$	-1.48515568...	+1.43084721...	2	2
30	$\frac{-2249 + 2192i}{1520}$	-1.47960526...	+1.44210526...	4	3
36	$\frac{-2182 + 2126i}{1475}$	-1.47932203...	+1.44135593...	6	5
48	$\frac{-42251 + 41166i}{28561}$	(perfectly exact) -1.47932495...	(perfectly exact) +1.44133608...	∞	∞
厳密解	$\frac{-42251 + 41166i}{28561}$	-1.47932495...	+1.44133608...	-	-

表 5: 展開係数のほぼ指数的な減衰

n	real part of f_n	imaginary part of f_n
0	-6.75984000378...e-1	± 0
1000	-2.84538929863...e-271	-9.83514249870...e-272
2000	+5.40708023241...e-550	-7.83428979204...e-549
3000	+8.49092503337...e-827	-1.66804004343...e-827
4000	+2.95369741917...e-1105	+6.01269219021...e-1105

表 6: ODE (7) の $\nu = 0, k = 3$ のときの比 $\frac{f_2}{f_0}$ の数値結果

$N+1$	比 $\frac{f_2}{f_0}$	比 $\frac{f_2}{f_0}$ の値の十進小数表示
50	$\frac{147826}{391819}$	0.3772813467442875409308890074243464456802758...
100	$\frac{208588565}{552872013}$	0.3772818303248061138518870912715200145245912...
150	$\frac{1969523740562}{5220298414229}$	0.3772818303248061138245150519347658988268210...
200	$\frac{531796829098893}{1409547946268876}$	0.3772818303248061138245150770765762118573286...
250	$\frac{651719569462020954}{1727407781341996633}$	0.3772818303248061138245150770767548665927969...
300	$\frac{150649258697699321707}{399301653535776433703}$	0.3772818303248061138245150770767548664028748...
厳密解 (無理比)	$3 + 2\sqrt{2e\pi}(\text{Erfc}(\frac{1}{\sqrt{2}}) - 1)$	0.3772818303248061138245150770767548664028706...

さらに、同じ ODE(7) で、変数のスケール変換 $x \rightarrow 30x$ を施して

$$\frac{1}{(30)^2} f'' - (30)^2 x^2 f + (2\nu + 1)f = 0 \quad (9)$$

とすると、解関数の広がりや基底関数の広がりスケールがよりマッチングして、数値性能は飛躍的に向上する。 $\nu = 0, k_0 = 6, K = 2\lfloor \frac{7(N-k_0)}{16} \rfloor + k_0, J = 2\lfloor \frac{15(N-k_0)}{32} \rfloor + k_0$ のときの結果を図 5・図 6 に示す。 $N+1 = 30000$ で展開係数比の有効数字 8783 桁、解関数の比の有効数字 2599 桁を確認した。また、他の展開係数比や他の座標点の解関数の比も、ほぼ同じ確度をもつことがわかった。さらに、(8) で定義された ρ は 1 に近く、展開係数比の非常に良い有理近似が得られていることがわかった。

次に、特異点のある Fuchs 型の ODE の例として、Legendre の陪微分方程式

$$(1-x^2)f'' - 2xf' + \left(\nu(\nu+1) - \frac{\mu^2}{1-x^2}\right)f = 0 \quad (10)$$

を挙げる。よく知られているように、滑らかな解が存在する 3 つの区間 $(-\infty, -1), (-1, 1), (1, \infty)$ があり、このうち、ノルム有限な解は $\{C \cdot 1_{[-1,1]}(x) \cdot (1-x^2)^{\frac{\mu}{2}} L_{\nu}^{\mu}(x) \mid C \in \mathbb{C}\}$ (但し $1_I(x)$ は定義関数, $(1-x^2)^{\frac{\mu}{2}} L_{\nu}^{\mu}(x)$ は Legendre 陪関数) のみである。この ODE を本解法で解いた数値解の解関数を図 7 にプロットする。基底関数は $(-1, 1)$ の区間の外側にも幅広く広がっているにもかかわらず、 $(-1, 1)$ の区間の外では数値解の値は殆んど 0 に近く、 $(-1, 1)$ の部分のみがうまく求まっていることがわかる。

同様の例として、 μ, ν を非負整数とする ODE

$$xf''(x) + f'(x) + \left(-\frac{x}{4} + \left(\nu + \frac{\mu+1}{2}\right) - \frac{\mu^2}{x}\right)f(x) = 0 \quad (11)$$

を挙げる。このノルム有限な解は、Laguerre 陪関数 $L_{\nu}^{\mu}(x)$ を用いて

$$f(x) = \begin{cases} C x^{\mu/2} e^{-x/2} L_{\nu}^{\mu}(x) & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \quad (C \in \mathbb{R})$$

と書くことが容易に確かめられる。 $\mu = 4, \nu = 3, k_0 = 0, N+1 = 200, 500, K = 2\lfloor \frac{3N}{8} \rfloor + k_0,$

Number of significant digits

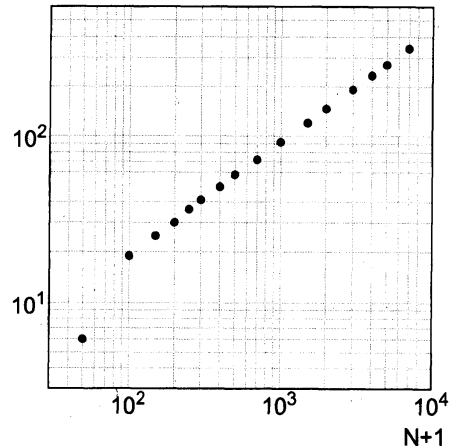


図 3: ODE (7) の $\frac{f_2}{f_0}$ の有効数字桁数

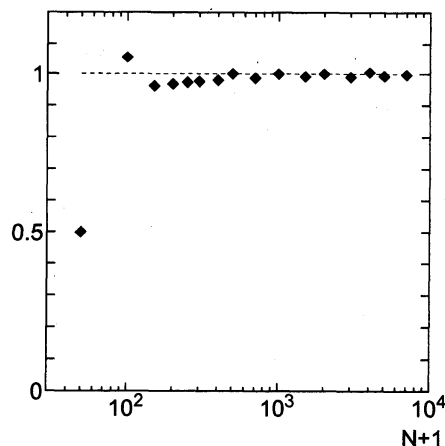


図 4: (8) で定義された ρ (ODE (7) の場合)

Number of significant digits

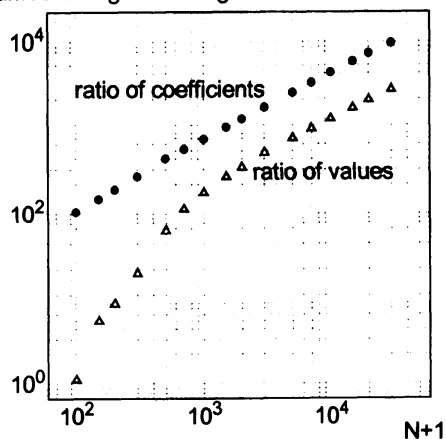


図 5: ODE (9) の展開係数比 $\frac{f_7}{f_6}$ と解関数の値の比 $\frac{f(1/30)}{f(0)}$ の有効数字桁数

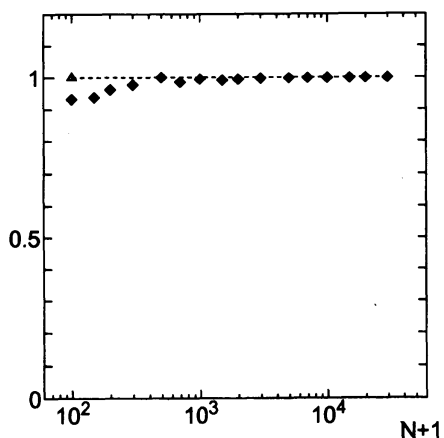


図 6: (8) で定義された ρ (ODE (9) の場合)

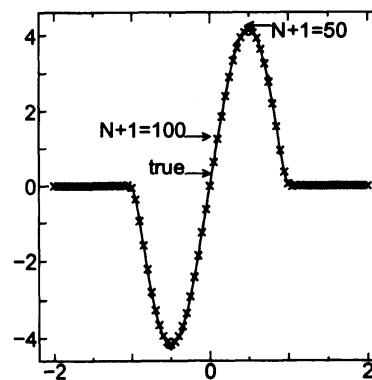


図 7: ODE (10) の数値解

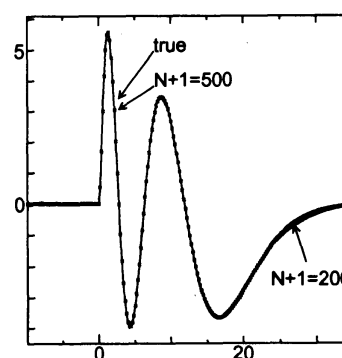


図 8: ODE (11) の数値解

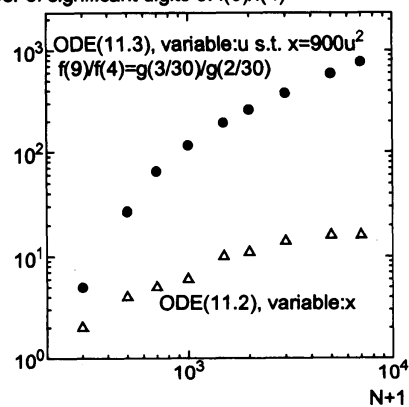
Number of significant digits of $f(9)/f(4)$ 

図 9: 解関数の比 $f(9)/f(4)$ の有効数字桁数の比較 (ODE (11) と ODE (12))

$J = 2\lfloor \frac{7N}{16} \rfloor + k_0$ のときのこの数値解を図8にプロットする。基底関数は $x < 0$ の部分にも広がっているにもかかわらず、やはり $x \geq 0$ の部分のみがうまく得られているのがわかる。

しかしながら、本解法で用いた基底関数による展開は、フーリエ級数と似た性質があるため、解関数に特異点（(10)の場合には $x = \pm 1$ 、(11)の場合には $x = 0$ ）が存在する場合には、展開係数の減衰のオーダーは逆冪オーダーになり収束が遅いため、よい数値性能が得られない。そこで、これをこの問題を解決することを考える。例えば、ODE(11)の場合には、変数変換 $x \rightarrow u$ （但し $x = cu^2$ 、 c は正定数）を行い、

$$u^2 g''(u) + u g'(u) + (-c^4 u^4 + c^2(4\nu + 2\mu + 2)u^2 - \mu^2) g(u) = 0 \quad (12)$$

とすることにより、 $x = 0$ にある特異性を除去することができる。すると、展開係数はほとんど指数的に減衰するので、数値性能は大幅に上がる。 $c = 30$ の場合の、解関数の比の有効数字を ODE (11) の場合と比較した結果を図9に示す。

次に、今までのいくつかの例について、計算量の分析をしてみた。まず、4節で説明した複素整数ベクトルの近似直交化において、連立1次方程式の解空間の基底ベクトルの取り直しの回数を数えてみた結果を図10に示す。比較的小さなオーダーで済んでいることがわかる。次に、総計算量の目安として、本解法全体に必要な固定長整数間の総乗算回数を数えてみた結果を図11に示す。いずれの場合も、 N の冪オーダー（経験的にほぼ3乗）で済んでいることがわかるが、これは、理論的なオーダー評価 ($O(N^3(\log N)^2)$) [2] にほぼ沿うものとなっている。なお、このオーダーは、解法の少しの改良により、 $O(N^2(\log N)^2)$ まで下げられることが判明している [2]。

さらに、本研究集会の発表のために、新たに以下のようないくつかの数値例を追加する（●は(9)に同じだが、比較のため再掲）。このうち、×はノルム有限な解の空間の次元が多次元のケースである。なお、収束を早めるため、(9)で説明したようなスケー

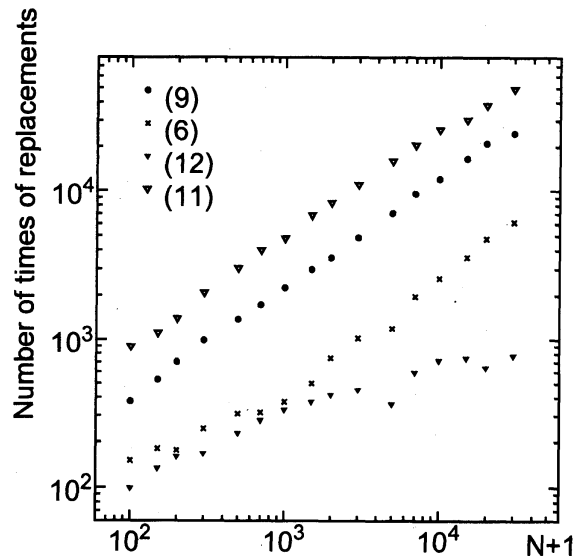


図 10: 近似直交化における基底ベクトルの取り直し回数

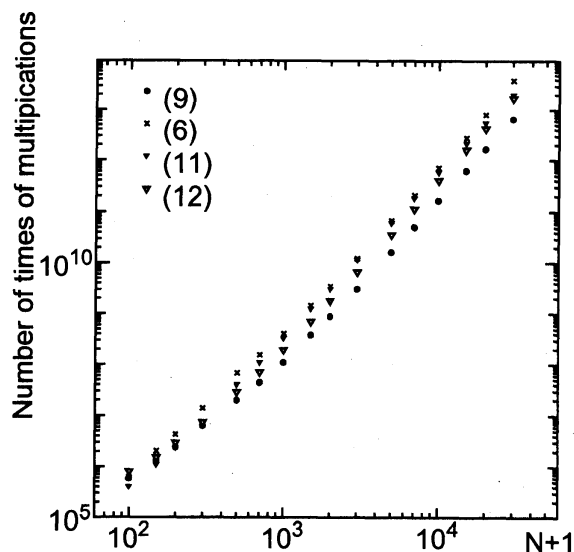


図 11: 64 ビット整数間の総乗算回数

ル変換を各例で適宜行ったが、その詳細については、ここでは省略する。これらについて、解の関数の有効数字の分析結果と、64ビット整数間の総乗算回数を数えた結果を、図12に示す。

●: $f'' + (x^2 + 1)f = 0,$

真解: $Ce^{-x^2/1},$ 比較: $\frac{f(1)}{f(0)} = e^{-1/2}.$

△: $(x^9 + 12x^5 - 20x^3 + 15x)f'''$

$+ (x^8 + 4x^4 + 4x^2 - 1)f''$

$+ (x^7 + x^5 - x^3 - x)f'$

$+ (x^6 + 3x^4 + 3x^2 + 1)f = 0,$

真解: $C\frac{e^{-x^2}}{x^2+1},$ 比較: $\frac{f(3)}{f(0)} = \frac{e^{-9}}{10}.$

▼: $f'' - \frac{4x^{10} + 14x^8 - 4x^7 - 6x^5 - 39x^4 + 16x^3 - 14x^2 + 2x + 3}{(x^2+1)^4} f$

$= 0,$

真解: $Ce^{-\frac{x^4+x+1}{x^2+1}},$ 比較: $\frac{f(2)}{f(0)} = e^{-1/5}.$

□: $f''' + \frac{24x^3 + 36x^2 - 6}{(x^2+x+1)^3} f = 0$

真解: $C\frac{1}{x^2+x+1}$ 比較: $\frac{f(2)}{f(0)} = \frac{1}{7}$

×: $\left(\frac{d^2}{dx^2} - X^2 + 1\right)\left(\frac{d^2}{dx^2} - X^2 + 5\right)f = 0$

真解: $C_1e^{-\frac{x^2}{2}} + C_2(4x^2 - 2)e^{-\frac{x^2}{2}}$

比較: $f(2) = -3e^{-2}f(0) + 4e^{\frac{3}{2}}f(1)$

なお、これらの例において「比較:」とあるのは、数値解の確度を確認するのに用いた、複座標点の間の解関数の値の関係である。

これらの例は、●と×を除いて、解関数のテーラー展開の収束半径が有限であり、伝統的な正則点周りの級数展開法などでは、大域的な解を求めることはできない例である。以上の5つの例の数値結果はすべて、64ビット整数間の乗算回数が、 N の3乗にほぼ比例し、したがって、要求する有効数字桁数の冪オーダー（経験的に3乗～5乗）で済むことを示している。

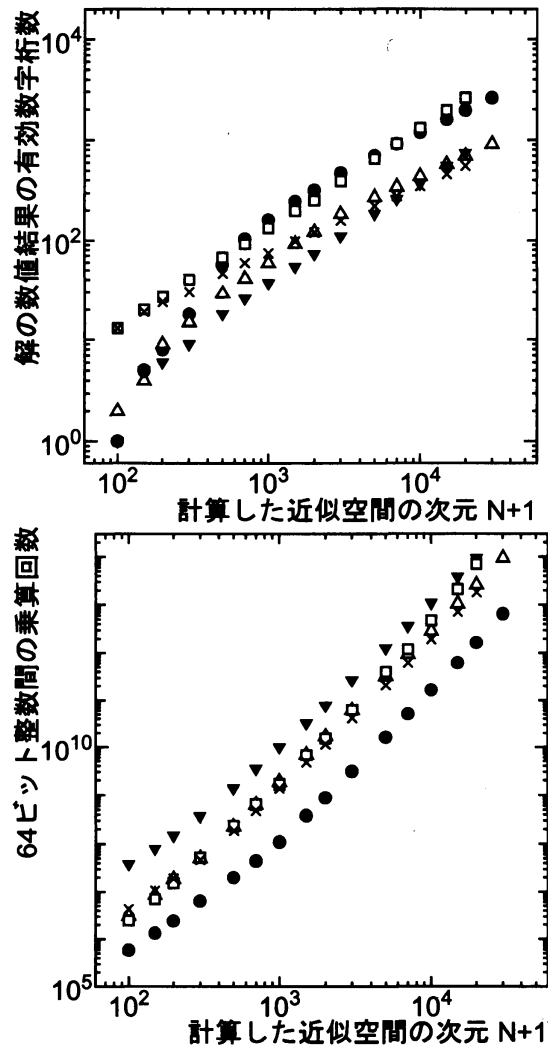


図 12: 数値例●△▼□×の分析結果

6 まとめと展望

滑らかな波束状の有理関数の基底関数を用い、ベクトルの近似直交化に基づいて、整数の四則演算のみを用いて高階線型常微分方程式を高い確度で解く一つの方法を提案した。本発表では同次方程式 $P(x, \frac{d}{dx})f = 0$ のみを扱ったが、非同次方程式 $P(x, \frac{d}{dx})f = g$ は階数の1つ高い同次型方程式 $(g\frac{d}{dx} - g')P(x, \frac{d}{dx})f = 0$ を解く問題に還元されるので、本解法は非同次型方程式にも広く適用可能である。

本解法の正当性は、いくつかの条件のもと、数学的枠組みから理論的に証明できる [1] [2] [3]。また、実際の多くの数値例で、本解法により、ごく普通のパソコン程度で、例えば有効数字数百桁・数千桁の確度で解が求まること、特異点のない場合は必要な計算量が要求する有効数字桁数の冪オーダー（経験的に3乗～5乗）で済むことを確認した。

また、本発表では触れなかったが、本手法の構造を利用して、線型補間の反復によって、線型常微分作用素の固有値問題を非常に高い確度で解く手法の提案に、筆者ら [5] [6] はすでに成功している。また、これを少し変形して、例えば周期ポテンシャルをもつシュレーディンガー方程式の固有値のバンド構造の分析にも応用でき、すでに数値的に良好な結果が得られている（加藤・坂口 [7]）。

本解法が高階線型偏微分方程式にも拡張可能なことが理論的にすでに判明しているので、その実現が今後の課題となる。但し、偏微分方程式の場合は、 B_P の行列表現が、普通のバンド対角行列ではなく、バンド幅がどんどん広がっていく行列になり、連立1次方程式の解の空間の次元が再帰的計算のたびに増大していく構造になるので、その実現には、離散数学的手法に基づいたいくつかの工夫が必要になる。

また、逐次近似法によって、非線型性の弱い非線形方程式への拡張も可能である。これは、基底関数に用いた有理関数 $\psi_{k,\tilde{n}}(x)$ に、その定義より $\psi_{k,\tilde{m}}(x)\psi_{\kappa,\tilde{n}}(x) = \psi_{k+\kappa+1,\tilde{m}+\tilde{n}}(x)$ という性質があり、この性質と漸化式 (5) により、基底関数の積が有限個 ($k+1$ 個) の基底関数の1次結合で書けるため、容易である。但し、この方法でそのまま逐次

近似法を用いようとする、行列のバンド対角構造を壊すことになり、今回用いたような再帰的計算は使えなくなるが、逐次近似のたびに近似空間の次元数を数倍ごと増やしていけば、この問題は回避できる。実際、逐次近似の近似の程度がまだ良くない段階で線型問題の近似空間の次元だけを大きくしても意味がないので、近似空間の次元数を増やしながら逐次近似を繰り返していくこの方法は、合理的であると思われる。

さらに、別な視点からは、本解法は特殊関数の高速高精度解法などにも応用が可能である。また、本手法で用いた基底関数は、フーリエ級数や複素関数論のローラン展開などにも密接な関係があり、さらには、例えば $V \setminus (V \cap \ell^2(\mathbb{Z}^+))$ に属する余剰解の大部分は、変数変換 $x \rightarrow z = \frac{x-i}{x+i}$ のもとに新たに発生する複素平面上の微分方程式の特異点 $z=1$ に存在する佐藤超関数の成分に起因することが、余剰解の有理数数列を解読することにより数値的に判明している。このように、本解法は、単なる数値解法にとどまらず、伝統的な解析学との間に多くの接点をもつため、数値数学と伝統的な解析学を結ぶ新たな展望を模索したい。

参考文献

- [1] F. Sakaguchi and M. Hayashi, 'General theory for integer-type algorithm for higher order differential equations', Numerical Functional Analysis and Optimization, **32**(5), 541-582 (2011).
- [2] *id.*, 'Practical implementation and error bound of integer-type algorithm for higher-order differential equations', *ibid.*, **32**(12), 1316-1364 (2011).
- [3] *id.*, 'Differentiability of eigenfunctions of the closures of differential operators with rational coefficient functions', arXiv:0903.4852 (2009, 2010).

- [4] *id.*, 'Coherent states and annihilation-creation operators associated with the irreducible unitary representations of $\mathfrak{su}(1,1)$ ', *Journal of Mathematical Physics*, **43**(5), 2241-2248 (2002).
- [5] *id.*, 'Integer-type algorithm for eigenfunction/eigenvalue problem of self-adjoint operators and its application to Schrödinger operators' (in preparation).
- [6] 坂口文則・林正人, 「シュレーディンガー方程式の固有値問題の整数型高確度解法」, 日本数学会 2010 年度年会応用数学科会予稿集 (2010).
- [7] 加藤万佐朗・坂口文則, 「微分方程式の整数型解法の量子力学への応用一周期ポテンシャルの場合一」, 第 26 回量子情報技術研究会資料, 165-166 (2012).